

Целью данной работы было изучение межмолекулярного взаимодействия нанодисперсных частиц оксида циркония с полимерами: поливинилбутералем, поливинилацетатом и поливиниловым спиртом.

В ходе работы получены пленки полимеров, содержащие различные количества нанопорошка методом полива из раствора. Методом изотермической калориметрии измерены энтальпии растворения композиций в этиловом спирте и воде, с использованием термохимического цикла Гесса рассчитаны энтальпии взаимодействия частиц оксида циркония с полимерными матрицами. Результаты обсуждены с учетом структурных особенностей полимерных матриц и их химической природы. Проведены физико-механические испытания пленок, измерены значения разрывного напряжения.

## ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РАСТЯЖЕНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ ГЛОБУЛЫ ЗА КОНЦЫ ЦЕПИ

*Долгова Т.Н., Павлов А.С.*

Тверской государственный университет

Полимеры представляют собой важный класс веществ, окружающих нас. Благодаря своим необычным свойствам они находят широкое применение в химии, физике, биологии, медицине, технологии, где они используются в элементах памяти и других устройствах цифровой техники. Более того, процессы самосборки белковых молекул лежат в основе процессов жизнедеятельности биологических систем и изучаются уже на протяжении нескольких лет. Однако, несмотря на достигнутые успехи, попытки получения нативной белковой структуры оказались неудачными.

В связи с этим возникла задача – понять механизм самосборки белковых систем путем постепенного растяжения полимерной цепочки из глобулярного состояния за ее концевые атомы. Поэтому нами методом молекулярной динамики смоделированы процессы растяжения простейших гомополимерных и гетерополимерных цепей.

Рассматривалась простейшая свободно-сочлененная цепь с фиксированными длинами связей. Дальние взаимодействия описывались комбинацией потенциалов Леннарда-Джонса и потенциала типа Юкавы. Рассмотрено поведение сравнительно коротких цепей, имеющих длину до 256 звеньев. Величина энергетического параметра потенциала была задана равной  $\epsilon=1.0$ , приведенная температура  $T=1.0$ . При этих условиях устойчивой конформацией макромолекулы является глобулярная (система значительно ниже  $\theta$  точки).

В процессе моделирования рассчитывались следующие характеристики цепи: компоненты тензора инерции, квадрат радиуса инерции, квадрат расстояния между концами цепи и спэны. Приложенная к концевым атомам сила является параметром расчета. Растяжения макромолекулы в состоянии рыхлого клубка подчиняется гуковскому закону и связано с потерей энтропии при растяжении. Анализ результатов моделирования показал, что можно выделить несколько режимов растяжения цепи, в зависимости от величины приложенной силы.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 04-03-32185).*

## ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗВЕНЬЕВ ГЕТЕРОЦЕПНОГО ПОЛИМЕРА НА УСЛОВИЯ ПЕРЕХОДА КЛУБОК - ГЛОБУЛА

*Явина И.В., Никитина М.Е., Павлов А.С.*

Тверской государственный университет

Целью данной работы было изучение влияния статистики распределения звеньев в двухбуквенном гетероцепном полимере на особенности перехода клубок – глобула. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в исследовании перехода клубок – глобула, в ранних работах имеются и серьезные недостатки. Прежде всего, это короткие цепи, исследуемые методами имитационного моделирования, при этом в образующейся глобуле практически все звенья являются поверхностными. Кроме того обычно исследуется переход *клубок – рыхлая глобула*, т.е. система находится вблизи от  $\theta$  - точки, хотя и ниже ее, а обычно используемая при этом система потенциалов, когда взаимодействие звеньев одного типа (сорт *A*) носит характер сильного притяжения, а другой тип атомов (сорт *B*) – стерическое отталкивание, перекрестное взаимодействие *A – B* носит, обычно, также характер стерического отталкивания.

В представленной работе расчеты проводились для молекул длиной  $N = 1024$  мономерных звеньев. Моделировалась отдельная цепочка без периодических граничных условий. Использовалась модель свободно-сочлененной цепи с объемными эффектами, состоящая из разнородных звеньев сортов *A* и *B*, распределенных регулярно вдоль цепи. Длины блоков разнородных мономеров одинаковы и варьировались от 1 до 512 (выбиралась из ряда  $2^n$ ).

Особенностью модели используемой в работе является, то что, оба типа блоков в гетерополимере являются гидрофобными. Дальние взаимодействия описывались потенциалом Леннарда-Джонса  $U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ . Значение энергетического параметра  $\varepsilon$  для взаимодействий типа *A – A*, было выбрано равным 1,0, для взаимо-